



TITLE:

ランダムな不純物に対する近似法II
:"排除効果"を考慮したself-
containedな第2近似と格子振動へ
の応用

AUTHOR(S):

米沢, 富美子; 本間, 静夫

CITATION:

米沢, 富美子 ...[et al]. ランダムな不純物に対する近似法II : "排除効果"を考慮したself-containedな第2近似と格子振動への応用. 物性研究 1968, 11(3): 233-255

ISSUE DATE:

1968-12-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/86789>

RIGHT:

ランダムな不純物に対する近似法 II

—— “排除効果” を考慮した self-contained な第 2 近似と
格子振動への応用 ——

京大基研 米 沢 富美子
東工大 本 間 静 夫

(11月28日受理)

§ 1. 序

不規則に置換された不純物の問題を，グリーン関数の方法でとり扱う際に，“排除効果”を考慮すること，すなわち，一つの格子点上に2つ以上の不純物が入りこむ可能性を，計算の過程から厳密にとり除くことは，母体原子と不純物原子とに関する二元的対称性 (dual symmetry) をみたすような結果を得るために，必要な手続きであることを先に示した。¹⁾

一方，この“排除効果”を正しく考慮しても，尙残る困難があり，例えば，自己エネルギーの発散の困難や，自己エネルギーに見かけ上の極が無数にあらわれるという問題は，解決されていない。これらは，結局，“排除効果”が余分に含まれすぎていて，与えられた近似の範囲で，“self-contained”にとり入れられていないためである。

このシリーズの^{2) 3)}Iでは，近似の各段階に於る self-containedness の要請の重要性を述べ，第一近似 (one-vertex approximation) の範囲で，問題を自己撞着的にとり扱う場合と，そうでない場合の2つの例について，“排除効果”がどのようにとり入れられるべきかを具体的に説明した。又，近似を系統的に進めて行く方法についてもふれた。

ここでは，それに続いて，近似を一段階上げて，第2近似 (two-vertex approximation) まで入れた場合の自己エネルギーを求める。勿論，“排除効果”は self-contained な形でとり入れる。この論文の後半では，求めら

れた自己エネルギーを使って，同位元素欠陥をもつ格子の，自乗振動数スペクトルを計算し，不純物による連続スペクトルの中に，2ヶの原子による島の局在モードが，如何に反映されるかを調べる。

§ 2. self-containedな2次の近似

Iの論文の表1で説明したように，近似をひとつ進めた場合には，2次の自己エネルギーとして，縦に第2列をとり，

$$\Sigma_2(k) = \Sigma(2, 1) + \Sigma(2, 2) \quad (2, 1)$$

を計算しなければならない。ここで， $\Sigma(2, 2)$ は2次のグラフ（既約な two-vertex diagrams）からの寄与をself-containedに計算した場合の自己エネルギーで， $\Sigma(2, 1)$ はこれら2次のグラフを含めたことによる，1次の自己エネルギーの損への補正の変化した部分である。 $\Sigma(2, 2)$ 及び $\Sigma(2, 1)$ の代表的な項は，それぞれ図1の(a)及び(b)のグラフで与えられる。グラフを式に解釈する処方箋は，論文Iで与えられているが，ここでは以下の説明に必要な部分について復習してみよう。図1(a)のグラフのように，2つの独立なバーテックスがあって，2つの独立な不純物1，2をあらわしている時には，このグラフからの寄与は， R_{12} （2つの不純物間の距離）のある関数 $F_2(R_{12})$ を使って， $\sum_{R_{12}} F_2(R_{12})$ と書ける。一方，図1(b)のように，2つのバーテックスが点線で結ばれている場合には，寄与は $-F_2(0)$ となる。したがって，全体としては $\Sigma_2(k)$ まで含めると，

$$\sum_{R_{12}} F_2(R_{12}) - F_2(0) = \sum_{R_{12} (\neq 0)} F_2(R_{12}) \quad (2, 2)$$

という形になり，結局(a)の方のグラフからの寄与を数えて，そのうちで $R_{12}=0$ となる項だけを差しひいておけば良いことになる。

$\Sigma(2, 1)$ は，定義からも明らかなように，2次のグラフをとり入れたことによる1次の項への補正に相当する。一方 $\Sigma(2, 2)$ の中の $R_{12}=0$ という項 $F_2(0)$ は，2ヶの不純物原子が，偶然同じ格子点上に来た場合の寄与をあらわしている。この項が，いわゆる見かけ上の極を導入する原因になっているの

であるが、(2, 2)式で示されているように、この項は先の $\Sigma(1, 2)$ と相殺する。従って、上で説明されたように、self-containedな方法で、新しくグラフをとり入れるたびに、それより低次の項への補正を修正するという方針をとれば、常に、モデルの前提に相反する項(いくつかの不純物原子が同一格子点に来た場合の効果)が自動的にとり除かれることになる。

次に、 $\Sigma(2, 2)$ を具体的に求める方法を考えてみよう。先にY-M⁴⁾で $\Sigma(2)$ を計算したが、これはIの表1で第2行を全て加え合わせた無限の項の和に相当し、

$$\Sigma(2) = \Sigma(2, 2) + \Sigma(2, 3) + \Sigma(2, 4) + \dots \quad (2, 3)$$

という形になる。この時には、各々のバーテックスに $P_S(c)$ を割り当てたが、今 $\Sigma(2, 2)$ を計算するためには、各々のバーテックスに割り当てる量を、 $P_S(c)$ から $Q_S(c)$ ^{*}に変えるだけで、あとは全て $\Sigma(2)$ を求めた時の手続きをそのままくり返せばよいことが示される。

まず(2, 3)式の右辺の各項の意味を考えてみると、 $\Sigma(2, 2)$ は既決な2次グラフを、そのはんいでself-containedに数えた場合の寄与を与え、 $\Sigma(2, 3)$ 、 $\Sigma(2, 4)$ 、……はそれぞれ既決な3次、4次、……のグラフからの、2次の項への補正に相当する。 $P_S(c)$ には、“self-containedness”に対する配慮が払われていないので、高次のグラフを含めた場合の補正の項が、無限に含まれてしまって、 $\Sigma(2, 3)$ 、 $\Sigma(2, 4)$ 、……といった形に分離できない。一方、 $Q_S(c)$ を考えると、高次のグラフから来る補正の項が厳密に除かれている。しかも、 $\Sigma(2, 2)$ までをとり入れると、既決な2次のグラフ自身を数えているのであるから、2次までの効果は正確にとり入れられることになる。したがって、 $\Sigma(2, 2)$ は結局既決な2次のグラフを、バーテックスには $Q_S(c)$ を割り当てるという方針で数え上げればよいことになる。

求めるべきグリーン関数と、自己エネルギーを、自己撞着的に決める場合を考えてみよう。この時には、 $\Sigma_2(k)$ として数えられるべきグラフは、第2(b)

* $Q_S(c)$ の $S \leq 10$ に対する具体的な形は、Appendix A に与えられている。

図で示されるような既決な2次のグラフである。相互作用線が波線であらわされているのは、2(b)図で定義されているように、通常の相互作用線の和になっていることを示すためである。相互作用線と相互作用線の間にあらわれる propagator は、近似が自己撞着的になっているため、真のグリーン関数をあらわす二重の線になっている。

2(b)図の、 $(2p-3)$ 番目、及び $(2p-2)$ 番目 ($p \geq 2$) にあらわれるグラフからの寄与を計算する詳しい方法は、 $Y-M$ ⁴⁾ で述べられているので、ここでは省略して結果のみを書く。 $(Y-M-III)$ ⁴⁾ の (3, 4) 式及び (3, 5) 式参照のこと。) $(2p-3)$ 番目、 $(2p-2)$ 番目のグラフからの寄与を、それぞれ $S_{kk'}^{(2p-3)}$ 、 $S_{kk'}^{(2p-2)}$ で表わすと、

$$S_{kk'}^{(2p-3)} = \delta(k-k') NV \sum_{R(\neq 0)} \exp(-ik \cdot R) \{ \alpha(\epsilon, R) \alpha(\epsilon, -R) \}^{p-1} \\ \chi \alpha(\epsilon, 0)^{-2p} \sum_{s=p}^{\infty} Q_s(c) B_{s,p}(\alpha(\epsilon, 0))^s \sum_{t=p}^{\infty} Q_t(c) B_{t,p}(\alpha(\epsilon, 0))^t \\ (p \geq 2) \quad (2, 4)$$

$$S_{kk'}^{(2p-2)} = \delta(k-k') NV \sum_{R(\neq 0)} \{ \alpha(\epsilon, R) \alpha(\epsilon, -R) \}^p \alpha(\epsilon, 0)^{-(2p+1)} \\ \chi \sum_{s=p+1}^{\infty} Q_s(c) B_{s,p+1}(\alpha(\epsilon, 0))^s \sum_{t=p}^{\infty} Q_t(c) B_{t,p}(\alpha(\epsilon, 0))^t \\ (p \geq 2) \quad (2, 5)$$

但し、ここで

$$\alpha(\epsilon, R) = V \sum_k G(\epsilon E_1; R) e^{ik \cdot R} \\ = \frac{NV}{E_1} \cdot \frac{E_1}{N} \sum_k G(\epsilon E_1; R) e^{ik \cdot R} \\ \equiv V \cdot Z(\epsilon, R) \quad (2, 6)$$

で、 $B_{s,p}$ は s ケのものを p の組に分ける分け方の数で、

$$B_{s,p} = \frac{(s-1)!}{(p-1)!(s-p)!} = \binom{s-1}{p-1} \quad (2,7)$$

で定義される。これは又、母関数を使って次の様に与えられる。

$$[L(x)]^p = \left(\frac{x}{1-x}\right)^p = \sum_{s=p}^{\infty} B_{s,p} x^s \quad (2,8)$$

又は

$$B_{s,p} = \frac{1}{s!} \frac{d^s}{dx^s} [L(x)]^p \Big|_{x=0} \quad (2,9)$$

これより、第2(b)図の全てのグラフからの寄与すなわち $\Sigma_2(k)$ は、(1, 4) 式及び (1, 5) 式の $S_{kk'}^{(2p-3)}$ 及び $S_{kk'}^{(2p-2)}$ を $p=2$ から ∞ まで加え合わせたもので与えられる。(1, 4) 式、(1, 5) 式から明らかなように、上記の如く求められた $\Sigma_2(k)$ には、 k を含む項と、 k を含まない項の2つ分けられる。これを対角的な項 ($\Sigma_2^{dia}(k)$) と対角的でない項 ($\Sigma_2^{non}(k)$) と呼ぶことにすると、

$$\begin{aligned} \Sigma_2^{dia}(k) &= \sum_{p=2}^{\infty} S_{kk'}^{(2p-2)} \\ &= \delta(k-k') NV \sum_{R(\neq 0)} \alpha(\epsilon, -R) \times \\ &\quad \times \left\{ \frac{\partial}{\partial u} {}_0F_1\left(2; \frac{\partial^2}{\partial v \partial v}\right) I(\alpha(\epsilon, 0) + \alpha(\epsilon, R) u : c) \times \right. \\ &\quad \left. \times I(\alpha(\epsilon, 0) + \alpha(\epsilon, -R) v : c) \Big|_{u,v=0} \right. \\ &\quad \left. - \alpha(\epsilon, R) I(\alpha(\epsilon, 0) : c) \frac{\partial}{\partial \alpha(\epsilon, 0)} I(\alpha(\epsilon, 0) : c) \right\} \end{aligned} \quad (2,10)$$

$$\begin{aligned} &= \delta(k-k') NV \sum_{R(\neq 0)} \alpha(\epsilon, R) \alpha(\epsilon, -R) \times \\ &\quad \times \sum_{r=1}^{\infty} (\alpha(\epsilon, R) \alpha(\epsilon, R))^r D_{r+1}(\alpha(\epsilon, 0) : c) D_r(\alpha(\epsilon, 0) : c) \end{aligned} \quad (2,11)$$

となる。但し $I(x:c)$, $D_n(x:c)$ は次式で定義される。

$$I(x:c) = \frac{c}{1-x\{1-I(x:c)\}} \quad (2,12a)$$

$$D_n(x:c) = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} I(x:c) \quad (2,12b)$$

(2,10) 式, 又は (2,11) 式の詳細な求め方は, Appendix B に示されている。同様にして, 対角的でない項も次の形に計算できる。

$$\begin{aligned} \Sigma_2^{\text{non}}(k) &= \delta(k-k') NV \sum e^{-ik \cdot R} \alpha(\epsilon, R) \\ &\times \left\{ {}_0F_1 \left(1, \frac{\partial^2}{\partial uv} \right) I(\alpha(\epsilon, 0) + \alpha(\epsilon, R)^u : c) I(\alpha(\epsilon, 0) + \alpha(\epsilon, -R)^v : c) \right. \\ &\quad \left. - I(\alpha(\epsilon, 0) : c)^2 \right\} \quad (2,13) \end{aligned}$$

$$= \delta(k-k') NV \sum_{R(\neq 0)} e^{-ik \cdot R} \alpha(\epsilon, R)$$

$$\times \sum_{r=1}^{\infty} (\alpha(\epsilon, R) \alpha(\epsilon, -R))^r (D_r(\alpha(\epsilon, 0); c))^2 \quad (2,14)$$

一方, もし近似を自己撞着的にしないとすれば, 図 2 (a) で示されるようなグラフを数えればよいことになり, その場合には, 各バーテックスには $Q_s^{(0)}(c)$ が割当てられる。

§ 3. 一次元のフォノンスペクトルへの応用

前節で求めた公式を使って, 不規則格子の振動数スペクトルを計算してみよう。この問題は, これまでいろいろの方法で研究され⁵⁾, 解析的にも, 数値計算の方向からも, 相当の知識が集積されて来ている。ことに Dean⁶⁾ や Payton and Visscher⁷⁾ らによる計算機実験の結果から, スペクトル中に, 少数個の不純物原子の島による局在モードの位置に対応すると思われる振動数のあたり

に、微細構造がみとめられた。この対応が一对一であることは、後に Hori and Fukushima⁸⁾ により解析的に確認された。一方 Matsuda⁹⁾, Hori¹⁰⁾ による special frequencies の存在の証明も、スペクトルが構造をもつことを支持している。

単純な摂動論の方法では、これらの微細構造は平均されてしまって、表にあらわれて来ない。しかし例えば、摂動展開の第2項まで正しくとり入れれば、少なくとも2個の不純物原子から成る島に起因する局在モードは、何らかの形でスペクトルにあらわな寄与をするはずである。

ここでは、上の事実にかんがみて、グリーン関数の formalism による摂動論の方法で、2次の項までとり入れた時に、この項の効果がスペクトルにどのように反映されるかに、特に注目して行きたい。

具体的な対象として、同位元素欠陥をもつ一次元の鎖状分子を考える。すなわち、質量 M をもつ $N(1-c)$ ケの質点と、質量 $m (< M)$ をもつ Nc ケの質点が、一直線上に間隔が a になるように並べられた系を考える。二種の質点の配置は不規則であるとする。この N ケの質点を、自然の長さ a のバネで結び、周期条件として、周期的境界条件を採用する。 $(u_{N+n} = u_n)$ 。バネの復元力は、質点の種類に関係なく一様に r とし、 n 番目の粒子の変位を u_n とすると、系の全エネルギーは

$$H = T + V$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \dot{u}_n^2 m_n + \frac{r}{2} \sum_{n=1}^N (u_{n+1} - u_n)^2 \quad (3, 1)$$

ラグランジェの運動方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{u}_n} \right) - \frac{\partial L}{\partial u_n} = 0 \quad (3, 2)$$

を求めると、

$$m_n \ddot{u}_n - r(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) = 0 \quad (3, 3)$$

ここで、 n 番目の質点の質量が M であれば 0 、 m であれば 1 をとるようなランダムに変数 ξ_n を導入すると、

$$\xi_n = \begin{cases} 1 & n \text{ が欠陥原子 (m) の場合} \\ 0 & n \text{ が母体原子 (M) の場合} \end{cases}$$

これを使って (3, 3) 式を書き変えると,

$$\begin{aligned} u_n - \frac{r}{M} (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \\ = \lambda \xi_n \frac{r}{M} (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \end{aligned} \quad (3, 4)$$

但しここで

$$\lambda = \frac{M-m}{m} \quad (3, 5)$$

u_n を規準座標を使って次の様に変換すると,

$$u_n = \frac{1}{N} \sum_{k=-N/2}^{N/2} Q_k e^{2\pi i k n / N - i \omega t} \quad (3, 6)$$

(3, 4) 式は結局次式の形になる。

$$(\omega^2 - \omega_k^2) Q_k - \sum_{k'} D_{kk'} Q_{k'} = 0 \quad (3, 7)$$

但しここで $D_{kk'}$ は, dynamical matrix と呼ばれる量で,

$$D_{kk'} = \frac{\lambda \omega_{k'}^2}{N} \rho(k' - k) \quad (3, 8)$$

$$\rho(k' - k) = \sum_n \xi_n e^{2\pi i (k' - k) n / N} \quad (3, 9)$$

で定義される。(3, 7) 式は, グリーン関数を

$$[G^{-1}(\omega^2)]_{kk'} = (\omega^2 - \omega_k^2) \delta_{kk'} - D_{kk'} \quad (3, 10)$$

とおけば

$$\det G^{-1}(\omega^2) = 0 \quad (3, 11)$$

という永年方程式を解くことに帰結される。一方，自乗振動数スペクトル分布関数 $D(\omega^2)$ は，

$$D(\omega^2) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_n \delta(\omega_n^2 - \omega^2) \quad (3, 12)$$

で定義されるから，グリーン関数を使って

$$D(\omega^2) = \frac{1}{\pi} \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \delta \rightarrow 0+}} \frac{1}{N} \text{Im Tr } G(\omega^2 + i\delta) \quad (3, 13)$$

と書くことができる。これは，母体原子と欠陥原子のひとつの配置に対するスペクトル分布関数であり，観測されるマクロな量と関連づけるためには，配位に対するアンサンブル平均を行わねばならない。この平均を $\langle \rangle$ であらわすと，

$$\begin{aligned} \langle D(\omega^2) \rangle &= \frac{1}{\pi} \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \delta \rightarrow 0+}} \frac{1}{N} \text{Im Tr } \langle G(\omega^2 + i\delta) \rangle \\ &= \frac{1}{\pi} \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \delta \rightarrow 0+}} \frac{1}{N} \text{Im} \sum_k \langle G_k(\omega^2 + i\delta) \rangle \end{aligned} \quad (3, 14)$$

第2式のように， k についての和に書けたのは，平均化の操作により translational invariance が回復して，行列 $\langle G \rangle$ は対角的になったためである。

一方，もとのグリーン関数を，(3, 10) 式を使って iterative に展開して行くと，

$$\begin{aligned} G_{kk'}(\omega^2) &= \frac{\delta_{kk'}}{\omega^2 - \omega_{k^2}} + \frac{1}{\omega^2 - \omega_{k^2}} D_{kk_1} \frac{1}{\omega^2 - \omega_{k_1^2}} \\ &\quad + \frac{1}{\omega^2 - \omega_{k^2}} D_{kk_1} \frac{1}{\omega^2 - \omega_{k_1^2}} D_{R_1 R_1} \frac{1}{\omega^2 - \omega_{k_1^2}} + \dots \end{aligned} \quad (3, 15)$$

となり，配位の効果は $D_{kk'}$ etc, のみに含まれる。したがって，平均化され

たグリーン関数を求めるには、 D の積の平均，すなわち $\langle D_{k k'} \rangle$ ， $\langle D_{k k_1} D_{k_1 k'} \rangle$ ， $\langle D_{k k_1} D_{k_1 k_2} D_{k_2 k'} \rangle$ …… が必要になる。これをもう少し具体的に書いてみると，

$$\langle D_{k k'} \rangle = \frac{\lambda \omega_k^2}{N} \langle \rho(k' - k) \rangle = \frac{\lambda \omega_k^2}{N} \cdot N Q_1(c) \delta(k' - k) \quad (3, 16)$$

$$\begin{aligned} \langle D_{k k_1} D_{k_1 k'} \rangle &= \frac{\lambda \omega_k^2}{N} \cdot \frac{\lambda \omega_{k_1}^2}{N} \langle \rho(k - k_1) \rho(k_1 - k') \rangle \\ &= \frac{\lambda \omega_k^2}{N} \cdot \frac{\lambda \omega_{k_1}^2}{N} \{ N Q_2(c) \delta(k' - k) \\ &\quad + N Q_1(c) \delta(k' - k_1) \cdot N Q_1(c) \delta(k_1 - k) \} \end{aligned} \quad (3, 17)$$

この結果を、Iで考えられた置換型不純物のポテンシャル中を運動する電子の散乱問題の場合と比較してみると、ポテンシャルの k ， k' 表示が対角的な場合に相当していることがわかる。これから、グラフと式の対応を第3図で示されたものと解釈すれば、第1節、第2節で与えた公式が使える。ただ、注意すべきことは、第2節の formulation で用いられたデルタ関数型のポテンシャルの場合とは異なり、 V が k -依存性をもつことになるので、式を少し書き変えなければならない。自己エネルギーの部分を書くと、

$$\Sigma_1(\omega^2; k) = \omega_k^2 \times \frac{\lambda c}{1 - f(\omega^2, 0) \{ \lambda - \Sigma_1(\omega^2; k) / \omega_k^2 \}} \quad (3, 18)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_2(\omega^2; R) &= \lambda \omega_k^2 \sum_{\nu = \pm 1, \pm 2, \dots} \{ \alpha(\omega^2, -\nu) \times \\ &\quad \times \left\{ \frac{\partial}{\partial u} {}_0F_1\left(2; \frac{\partial^2}{\partial uv}\right) I(\alpha(\omega^2, 0) + \alpha(\omega^2, \nu) u; c) \times \right. \\ &\quad \left. \times I(\alpha(\omega^2, 0) + \alpha(\omega^2, -\nu) v; c) \right\} \Big|_{u, v=0} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\alpha(\omega^2, \nu) I(\alpha(\omega^2, 0) : c) \frac{\partial}{\partial \alpha(\omega^2, 0)} I(\alpha(\omega^2, 0) : c) \} \\
 & + e^{-2\pi i k \nu / N} \alpha(\omega^2, \nu) \times \\
 & \times \left\{ {}_0F_1\left(1, \frac{\partial^2}{\partial u \partial v}\right) I(\alpha(\omega^2 : 0) + \alpha(\omega^2, \nu) u : c) I(\alpha(\omega^2 : 0) + \alpha(\omega^2, \\
 & -\nu) v : c) \Big|_{u, v=0} - I(\alpha(\omega^2 : c) : c)^2 \right\} \} \\
 & \qquad \qquad \qquad (1, 19)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & = \lambda \omega_k^2 \sum_{\nu=\pm 1, \pm 2, \dots}^{\infty} \alpha(\omega^2 : \nu) \sum_{r=1}^{\infty} \left[\alpha(\omega^2 : -\nu) D_{r+1}(\alpha(\omega^2 : 0) : c) \right. \\
 & \qquad \qquad \qquad \left. + e^{-2\pi i k \nu / N} D_r(\alpha(\omega^2 : 0) : c) \right] \\
 & \times D_r(\alpha(\omega^2 : 0) : c) (\alpha(\omega^2 : \nu) \alpha(\omega^2 : -\nu))^r
 \end{aligned}$$

(3, 20)

但し, $\alpha(\omega^2, \nu)$, $f(\omega^2, \nu)$, は次の式で与えられる。

$$\alpha(\omega^2, \nu) = \frac{\lambda}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle G_{\mathbf{k}}(\omega^2) \rangle \omega_{\mathbf{k}}^2 e^{2\pi i \nu \mathbf{k} / N} \equiv \lambda f(\omega^2, \nu) \quad (3, 21)$$

一方, 平均された全グリーン関数は, プロパーな自己エネルギーとして2次のバーテックスを含むものまで考慮すると,

$$\langle G_{\mathbf{k}}(\omega^2) \rangle = \frac{1}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2 - \Sigma_1(\omega^2 : \mathbf{k}) - \Sigma_2(\omega^2 : \mathbf{k})} \quad (3, 22)$$

と書ける。

§ 4. 具体的な計算の進め方

前節の(3, 13)式で与えられる自乗振動数スペクトルを求めるためには, (3, 18)~(3, 22)式を使ってグリーン関数 $\langle G_{\mathbf{k}}(\omega^2) \rangle$ を自己撞着的に計算しなければならない。(3, 22)式により, 平均された全グリーン関数は,

プロパーな一次及び二次の自己エネルギー $\Sigma_1(\omega^2; k)$, $\Sigma_2(\omega^2; k)$ を使って決められるが，一方，例えば $\Sigma_2(\omega^2; k)$ の定義式 (3, 19) 又は (3, 20) 式には，求められるべき全グリーン関数が，被積分関数の一部分としてあらわれ，複雑な形に入り組んでいて，解析的には勿論，数値計算を行う際にも，直接的な計算は出来ず，適当な出発点を選んで iterative な方法を採用することが必要になる。すなわち，まず (3, 21) 式を使って $\alpha(\omega^2; \nu)$ を決める際に， $\langle G_k(\omega^2) \rangle$ として正確に求められるべき全グリーン関数の代りに，ある試行関数を代入して最初の $\alpha(\omega^2; \nu)$ を計算する。次にこの $\alpha(\omega^2, \nu)$ を (3, 18) 式，(3, 19) 式 (又は (3, 20) 式) に代入して， $\Sigma_1(\omega^2, k)$, $\Sigma_2(\omega^2, k)$ を決める。得られた自己エネルギー $\Sigma(\omega^2, k) = \Sigma_1(\omega^2, k) + \Sigma_2(\omega^2, k)$ を (3, 22) に代入して，グリーン関数 $\langle G_k(\omega^2) \rangle$ を求め，これを新しい試行関数として，上と同様の手続きをくり返す。この iterative な手続きは，得られた全グリーン関数 $\langle G_k(\omega^2) \rangle$ が，一段階前の手続きで得られたものと等しくなり，それ以上 iteration をくり返しても $\langle G_k(\omega^2) \rangle$ の値が変らなくなるまで続ける。この様にして計算された $\langle G_k(\omega^2) \rangle$ は，正しい全グリーン関数になっていると考えられる。

出発点となるべき試行関数の選び方には，いろいろの方法があるが，この試行関数の選び方が適切であれば，比較的少い回数の iteration によって， $\langle G_k(\omega^2) \rangle$ の最終的な値に到達できるが，選び方が不適当な場合には，正しい $\langle G_k(\omega^2) \rangle$ の値に収束するまでに iteration を何度もくり返さねばならないことになる。しかし，何らかの判定条件の下に選ばれた試行関数が，ある振動数に対して良い出発点となり得ても，それは必ずしも全ての振動数領域で良い第一近似となるとは限らないことに注意すべきである。これは，近似の妥当性に対する条件が振動数の大きさによって異なることによる。

さて，我々の数値計算では，具体的には第一近似 $\Sigma_1(\omega^2, k)$ のみを含めた時に得られるグリーン関数を出発点の試行関数として使った。 $\Sigma_1(\omega^2, k)$ まで考慮した場合には，(3, 18) 式から明らかなように， $\Sigma_1(\omega^2, k) / \omega_k^2$ を r と書くと， r は R を含まない量になり

$$r(\omega^2) \equiv \Sigma_1(\omega^2, k) / \omega_k^2$$

$$= \frac{\lambda c}{1 - f(\omega^2, 0) \{ \lambda - r(\omega^2) \}} \quad (4, 1)$$

と書ける。一方この場合の $f(\omega^2, 0)$ は, (3, 21) 式と (3, 22) 式より

$$\begin{aligned} f(\omega^2, 0) &= \frac{1}{N} \sum_k \frac{\omega_k^2}{\omega^2 - \omega_k^2 (1 + r(\omega^2))} \\ &= \frac{1}{1 + r(\omega^2)} \left\{ \frac{1}{1 + r(\omega^2)} \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\omega^2 / (1 + r(\omega^2)) - \omega_k^2} - 1 \right\} \\ &= \frac{1}{1 + r(\omega^2)} \left\{ \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_M^2 (1 + r(\omega^2))} - 1 \right\} \end{aligned} \quad (4, 2)$$

(4, 1) を $f(\omega^2, 0)$ について解くと

$$f(\omega^2, 0) = \frac{r(\omega^2) - \lambda c}{r(\omega^2) (\lambda - r(\omega^2))} \quad (4, 3)$$

(4, 2) 式と (4, 3) 式より $f(\omega^2, 0)$ を消去すると, $r(\omega^2)$ に関する 3 次方程式

$$\begin{aligned} \{ (1 - \lambda c + \lambda) r(\omega^2) - \lambda c \} &= -x \{ r(\omega^2) - \lambda c \} \{ r^2(\omega^2) - (1 + 2\lambda - \lambda c) r(\omega^2) \\ &\quad + \lambda c \} \end{aligned} \quad (4, 4)$$

が得られる。したがって出発点とする第一近似のグリーン関数は, 3 次方程式 (4, 4) を解いて得られることがわかった。

結果を示す前に, 1 々の不純物原子による局在モード, 及び 2 々の隣り合う不純物原子による局在モードがあらわれる振動数を計算しておく, λ を使って下のようにあらわされることが示される。

① 1 々の不純物原子による局在モードの位置

$$\omega^2 / \omega_M^2 = \frac{(1 + \lambda)^2}{1 + 2\lambda} \quad (4, 5)$$

($1 - \alpha(\omega^2, 0) = 0$ の根)

② 2ヶの相隣合う不純物原子による局在モードの位置

$$\omega^2 / \omega_M^2 = \frac{(1+\lambda)^2}{4\lambda} \quad \text{と} \quad \frac{(1+\lambda) \{-1+3\lambda + \sqrt{1+10\lambda+9\lambda^2}\}}{8\lambda} \quad (4,6)$$

$$(\{1-\alpha(\omega^2, 0)\}^2 - |\alpha(\omega^2, 1)|^2 = 0 \text{ の根})$$

この局在モードの位置を S , D_1 , D_2 であらわすと, $M/m=3$ の場合には

$$\begin{aligned} S &= 1.8 \\ D_1 &= 1.125 \\ D_2 &= 2.3539 \end{aligned} \quad (4,7)$$

となる。

$\Sigma_2(k)$ までを正確にとり入れ, 上に述べた iteration の手続きにより求めた自乗振動数スペクトルを図4~6に示す。質量比は3, c は各々0.1, 0.26, 0.5である。ヒストグラムは, Deanによる計算機実験の結果である。

点線は, $\Sigma_1(k)$ まで含めて得られた結果, 実線は $\Sigma_2(k)$ までとり入れた場合である。上記の S , D_1 , D_2 及び2ヶの不純物原子が第二隣接格子上にある場合の局在モードの位置 D_1^1 , D_2^1 に対応する位置にスパイクがみとめられ, 第一近似 ($\Sigma_1(k)$ まで考慮) の結果と比べて, 明らかにスペクトルは良くなっている。

微細構造が, Deanの計算機による結果のようにシャープに出ないのは, ここで述べた近似が, c_p (critical percolation concentration) より大きい濃度領域で良い近似になっていて, それからはずれるとあまり良い結果を与えないことと関係している。すなわち, 一次元のモデルを対象にする限り, $c_p=1$ であるから, どんな濃度をとってみても, 必ず $c < c_p$ となり上の条件がみたされていないからである。したがって, 近似の妥当性その他を検討するためには, 2次元, 3次元のモデルについて同様の方針で振動数スペクトルを計算する必要がある。この計算は目下進行中である。

しかし, いずれにしても, §2.で与えられた形で $\Sigma_2(k)$ をとり入れることにより, 要求される解析的性質 (host-defect dual symmetry, 自己エネルギーの収束性, 見かけの極の消失等) は全てみたされていて, しかもスペ

クトルの微細構造を説明できるような近似が得られることが示されたことになる。

Appendix A

o $Q_s(c)$ の $s \leq 11$ に対する具体的な形

$$Q_1(c) = c$$

$$Q_2(c) = c - c^2$$

$$Q_3(c) = c - 3c^2 + 2c^3$$

$$Q_4(c) = c - 6c^2 + 10c^3 - 5c^4$$

$$Q_5(c) = c - 10c^2 + 30c^3 - 35c^4 + 14c^5$$

$$Q_6(c) = c - 15c^2 + 70c^3 - 140c^4 + 126c^5 - 42c^6$$

$$Q_7(c) = c - 21c^2 + 140c^3 - 420c^4 + 630c^5 - 462c^6 + 132c^7$$

$$Q_8(c) = c - 28c^2 + 252c^3 - 1050c^4 + 2310c^5 - 2772c^6 \\ + 1716c^7 - 429c^8$$

$$Q_9(c) = c - 36c^2 + 420c^3 - 2310c^4 + 6930c^5 - 12012c^6 \\ + 12012c^7 - 6435c^8 + 1430c^9$$

$$Q_{10}(c) = c - 45c^2 + 660c^3 - 4620c^4 + 18018c^5 - 42042c^6 \\ + 60060c^7 - 51480c^8 + 24310c^9 - 4862c^{10}$$

$$Q_{11}(c) = c - 55c^2 + 990c^3 - 8580c^4 + 42042c^5 - 126126c^6 \\ + 240240c^7 - 291720c^8 + 218790c^9 - 92378c^{10} \\ + 16796c^{11}$$

Appendix B

○ $\Sigma_2(k)$ の求め方

$\Sigma_2(k)$ を求める準備として, $Q_S(c)$ と $I(x:c)$ との関係を求めてみよう。

$I(x, c)$ は $Q_S(c)$ の母関数で, $Q_S(c)$ を使って

$$I(x:c) = \sum_{n=1}^{\infty} Q_n(c) x^{n-1} \quad (B, 1)$$

で与えられる。この $I(x:c)$ は, x の全ての値に対して解析的である。これを前提として, いま $\frac{1}{2\pi i} \oint_c \frac{I(x:c)}{x^s} dx$ を考えよう。ここで積分路 c は原点をかこむ任意の閉曲線である。

(B, 1) を使うと

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_c \frac{I(x:c)}{x^s} dx = \frac{1}{2\pi i} \oint_c \sum_{n=1}^{\infty} Q_n(c) \frac{x^{n-1}}{x^s} dx = Q_S(c) \quad (B, 2)$$

これが, $I(x:c)$ から $Q_S(c)$ を求める式である。

次に (2, 5) 式の $S_{kk'}^{(2p-2)}$ を (2, 10) 式に代入して, $\Sigma_2^{\text{dia}}(k)$ を求める方法を調べる。

$$\begin{aligned} \Sigma_2^{\text{dia}} &= \sum_{p=2}^{\infty} S_{kk'}^{(2p-2)} \\ &= \delta(k-k') NV \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{R(\neq 0)} \{ \alpha(\epsilon, R) \alpha(\epsilon, -R) \}^p \alpha(\epsilon, 0)^{(2p+1)} \\ &\quad \times \sum_{s=p+1}^{\infty} Q_S(c) B_{s, p+1}(\alpha(\epsilon, 0))^s \sum_{t=p}^{\infty} Q_t(c) B_{t, p}(\alpha(\epsilon, 0))^t \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \delta(k-k') NV \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{R(\neq 0)} \{ \alpha(\epsilon, R) \alpha(\epsilon, -R) \}^p \alpha(\epsilon, 0)^{-(2p+1)} \\ &\quad \times \sum_{s=p+1}^{\infty} \frac{1}{2\pi i} \oint_c \frac{I(x:c)}{x^s} dx \times B_{s, p+1}(\alpha(\epsilon, 0))^s \end{aligned}$$

$$\times \sum_{t=p}^{\infty} \frac{1}{2\pi i} \oint_{c^1} \frac{I(y:c)}{y^t} dy \times B_{t,p}(\alpha(\epsilon, 0))^t$$

ここで、積分路は原点をかこむ半径 $R (> 1/\alpha(\epsilon, 0))$ とする。(2, 8) 式を使って上の式をまとめ、 x と y に対する核素積分を行くと、

$$\Sigma_2^{\text{dia}} = \delta(k - k') NV \sum_{p=2}^{\infty} \sum_{R (\neq 0)} \left\{ \alpha(\epsilon, R) \alpha(\epsilon, -R) \right\}^p \alpha(\epsilon, 0)^{-(2p+1)}$$

$$\times \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^2 \oint_{c^1} \oint_{c^1} dx dy I(x:c) I(y:c) \left\{ \frac{\alpha(\epsilon, 0)}{x} \right\}^{p+1} \left\{ \frac{\alpha(\epsilon, 0)}{y} \right\}^p$$

$$= \delta(k - k') NV \sum_{R (\neq 0)} \left[\alpha(\epsilon, -R) \sum_{n=1}^{\infty} Q_n(c) Q_n(c) \alpha(\epsilon, 0)^{m+n-2} \right]$$

$$\times \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r! (r+1)!} \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{\partial^2}{\partial u \partial v} \right)^r \left(1 + \frac{\alpha(\epsilon, R)}{\alpha(\epsilon, 0)} u \right)^{m-1} \left(1 + \frac{\alpha(\epsilon, -R)}{\alpha(\epsilon, 0)} v \right)^{n-1} \Big|_{u, v=0}$$

$$- \alpha(\epsilon, R) \alpha(\epsilon, -R) I(\alpha(\epsilon, 0):c) \frac{\partial}{\partial \alpha(\epsilon, 0)} I(\alpha(\epsilon, 0):c) \Big]$$

(B, 3)

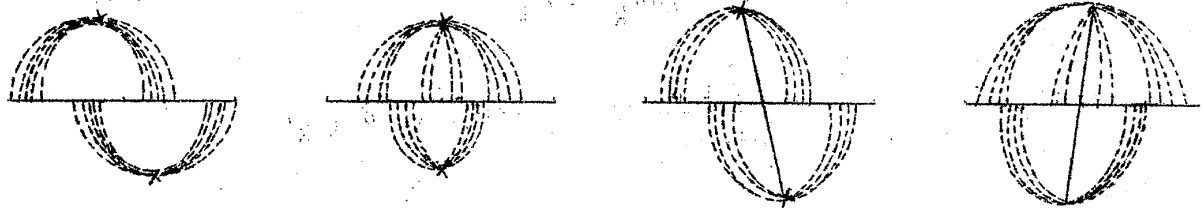
これより $\Sigma_2^{\text{dia}}(k)$ に対する (2, 10) 式又は (2, 11) 式が求まる。

$\Sigma_2^{\text{non}}(k)$ も同様の方針で求めることができる。

文

献

- 1) F. Yonezawa and T. Matsubara; II, Progr. Theor. Phys. 35, 357 (1966)
- 2) 米沢富美子, 物性研究 vol 10 No.2 (1968), 118.
- 3) F. Yonezawa, Progr. Theor. Phys. 40, 734 (1968)
- 4) F. Yonezawa and T. Matsubara, III, Progr. Theor. Phys. 35, 759 (1966)
- 5) see a review article by A. A. Maradudin, Solid State Phys. 18, 273, (1966)
- 6) P. Dean, Proc. Roy. Soc. (London) A260, 263 (1961)
- 7) D. N. Payton and W. M. Visscher, Phys. Rev. 154, 802 (1967)
- 8) J. Hori and M. Fukushima, J. Phys. Soc. Japan 19 (1964), 296.
- 9) H. Marsuda, Progr. Theor. Phys. 27 (1962), 811.
ibid 31 (1964), 161.
- 10) J. Hori, Progr. Theor. Phys. Suppl. No.23 (1962), 3.



(a) $\Sigma(2, 2)$ の代表的な項

(b) $\Sigma(2, 1)$ の代表的な項

図1 $\Sigma(2, 2)$ 及び $\Sigma(2, 1)$ に寄与する項

$$(a) \quad \Sigma_2^{(0)}(k) = \text{[Diagram 1]} + \text{[Diagram 2]} + \text{[Diagram 3]} + \dots$$

$$(a') \quad \text{[Diagram 4]} = \text{[Diagram 5]} + \text{[Diagram 6]} + \text{[Diagram 7]} + \dots$$

$$(b) \quad \Sigma_2(k) = \text{[Diagram 8]} + \text{[Diagram 9]} + \text{[Diagram 10]} + \dots$$

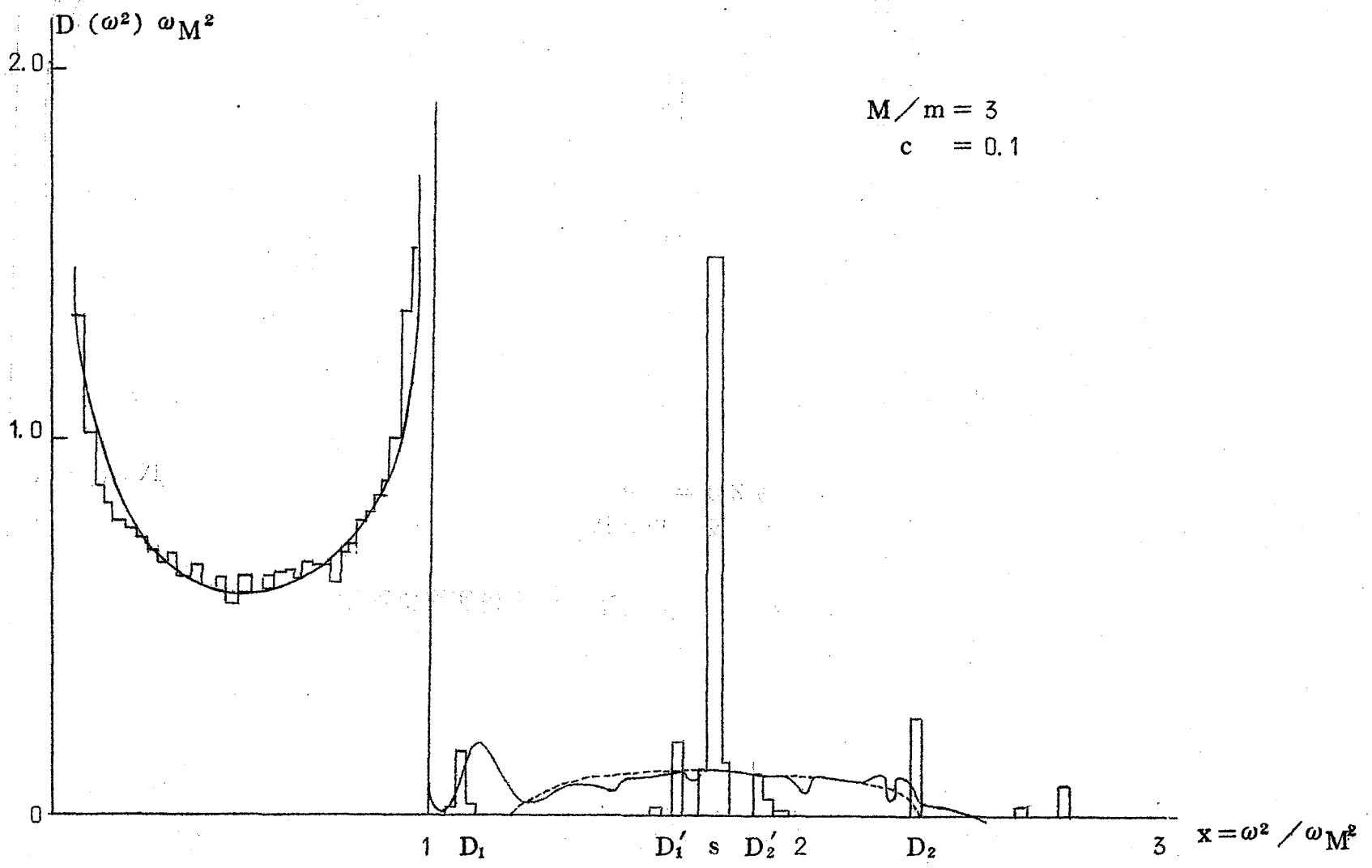
$$(b') \quad \text{[Diagram 11]} = \text{[Diagram 12]} + \text{[Diagram 13]} + \text{[Diagram 14]} + \dots$$

図2 $\Sigma_2^{(0)}(k)$ 及び $\Sigma_2(k)$ に寄与するグラフ

$$\begin{aligned}
 \text{---} &= \langle G_{k k'}(\omega^2) \rangle = \frac{\delta_{k k'}}{\omega^2 - \omega_k^2 - \sigma_k(\omega^2)} \equiv G(\omega^2, k) \delta_{k k'} \\
 \text{---} &= G^0_{k k'}(\omega^2) = \frac{\delta_{k k'}}{\omega^2 - \omega_k^2} \equiv G_0(\omega^2, k) \delta_{k k'} \\
 \text{---} &= \frac{\lambda \omega_k \omega_{k'}}{N} \\
 \text{---} &= Q_s(c)
 \end{aligned}$$

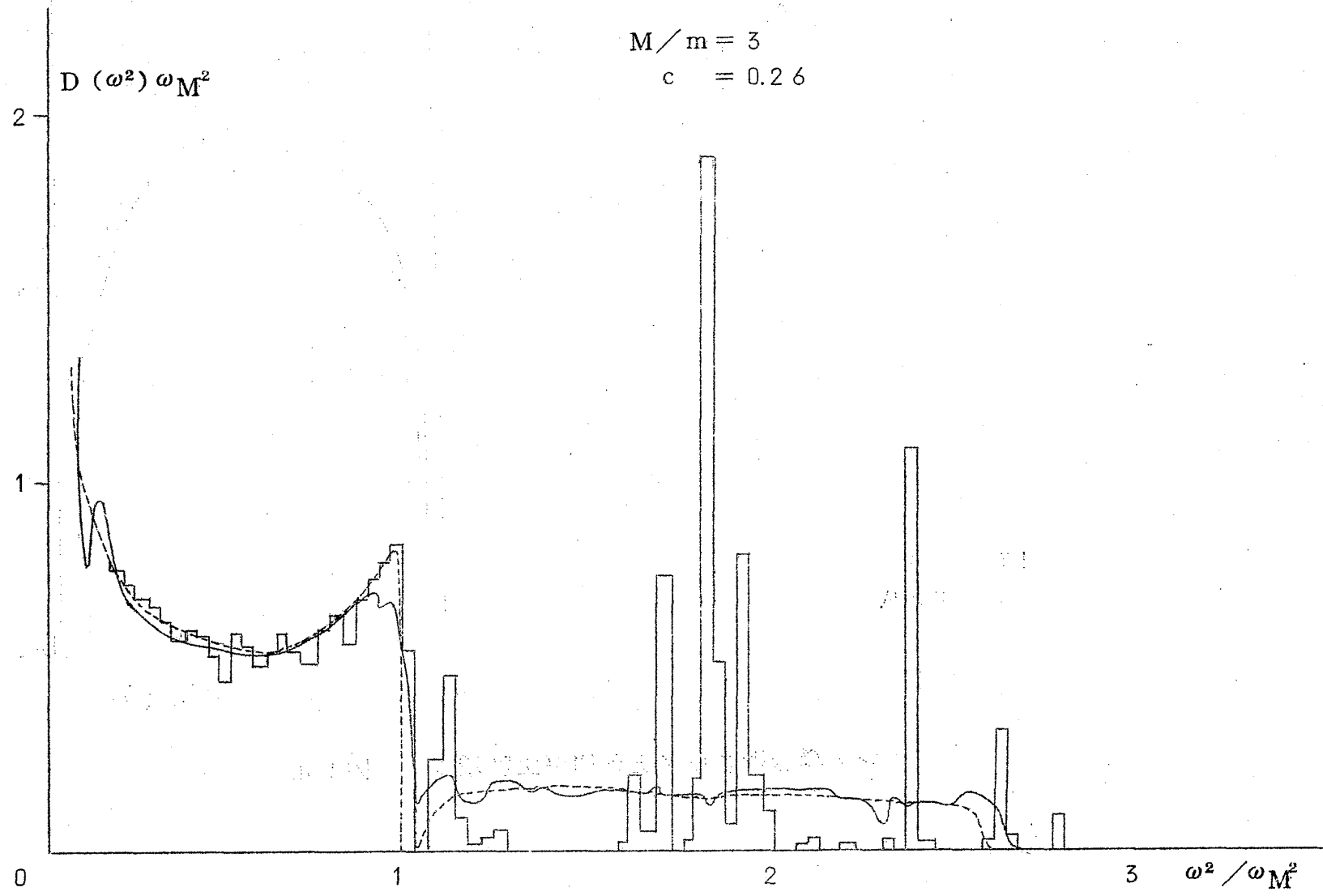
図3 1次元の格子振動スペクトルの場合のグラフによる解釈

第4図 1次元不規則格子の自乗振動数スペクトル



-253-

第5図 1次元不規則格子の自乗振動数スペクトル



第6図 1次元不規則格子の自乗振動数スペクトル

